

# ДВУМЕРНЫЙ ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИЙ АНТИФЕРРОМАГНЕТИК $S = 1$ С ДВУМЯ ТИПАМИ ОБМЕННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ: RSRG- И DMRG-АНАЛИЗ

*В. Е. Синицын, А. С. Боярченко, А. С. Овчинников\*, И. Г. Бострем*

*Уральский государственный университет  
620053, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 14 декабря 2004 г.

Рассмотрена анизотропная гейзенберговская модель спина  $S = 1$  на двумерной гексагональной решетке (образованной из взаимодействующих цепочек) с двумя типами антиферромагнитных взаимодействий между ближайшими соседями методом ренормализационной группы в реальном пространстве. Исследуется вопрос, как межцепочечное спаривание сказывается на критических свойствах модели, построена ее фазовая диаграмма. Для изотропного случая с помощью двумерного алгоритма ренормгруппы матрицы плотности рассчитывается энергия основного состояния в зависимости от отношения межцепочечного и внутрицепочечного взаимодействий.

PACS: 05.10.Cc, 75.50.Ee

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее десятилетие магнитные системы со структурой, образованной из взаимодействующих спиновых цепочек, являются предметом активных исследований. Если величина межцепочечного обмена много меньше внутрицепочечного взаимодействия, то при достаточно высоких температурах эти системы обладают свойствами, присущими одномерным магнетикам. Однако при понижении температуры магнитное взаимодействие между цепочками начинает играть существенную роль и определяет магнитное поведение системы.

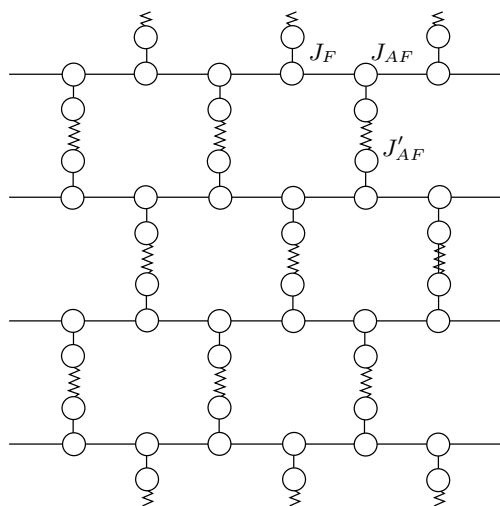
В данной работе мы рассматриваем методами ренормализационной группы в реальном пространстве (RSRG) и матрицы плотности (DMRG) двумерную магнитную систему с гексагональной решеткой, образованной антиферромагнитно взаимодействующими цепочками спина  $S = 1$  с внутрицепочечным антиферромагнитным взаимодействием, когда модель эквивалентна двумерному антиферромагнетнику спина  $S = 1$  с двумя типами взаимодействий между ближайшими соседями. Для этой цели в методе RSRG мы используем гейзенберговский гамильтониан с обменной анизотропией изинговского типа, а в мето-

де DMRG — изотропный случай модели. Основная цель — выяснить, как межцепочечное спаривание влияет на критические свойства и энергию основного состояния системы.

Интерес к этой задаче мотивирован, прежде всего, экспериментальной реализацией нового класса органических магнетиков PNNNO и  $F_2$ PNNNO. Каждое из этих соединений включает два спина  $S = 1/2$ , спаренных ферромагнитным взаимодействием  $J_F$ . Дальнейшее антиферромагнитное взаимодействие этих пар образует соответствующую пространственную кристаллическую структуру. Благодаря сильному ферромагнитному взаимодействию  $J_F$  (порядка 600 K), соединения PNNNO и  $F_2$ PNNNO можно рассматривать как системы, состоящие из антиферромагнитных цепочек спина  $S = 1$  (см. рис. 2а тип-I в работе [1]).

Экспериментально было обнаружено, что в соединении PNNNO межцепочечное взаимодействие имеет трехмерный характер, в то время как соединение  $F_2$ PNNNO обладает двумерным ( $2D$ ) межцепочечным взаимодействием. Как следствие, свойства PNNNO могут быть объяснены в рамках модели одномерных антиферромагнитных цепочек, упорядочивающихся неелевским образом в трехмерном пространстве при температуре порядка 1 K благодаря слабому межцепочечному взаимодействию, в то вре-

\*E-mail: alexander.ovchinnikov@usu.ru



**Рис. 1.** Магнитная модель соединения  $F_2PNNNO$ : однородные цепочки с внутримолекулярным ферромагнитным спариванием ( $J_F$ ) и внутрицепочечным антиферромагнитным обменом ( $J_{AF}$ ). Цепочки взаимодействуют антиферромагнитно ( $J'_{AF}$ ). Предельный вариант модели ( $J_F \rightarrow \infty$ ) — антиферромагнитная гексагональная решетка спина  $S = 1$

мя как соединение  $F_2PNNNO$  со сравнимыми величинами антиферромагнитных обменных взаимодействий  $J_{AF}$  и  $J'_{AF}$  представляет собой двумерную магнитную систему спинов  $S = 1$  на гексагональной решетке (рис. 1).

С другой стороны, интерес к антиферромагнитным моделям спина  $S = 1$  вновь возрос, после того как было найдено, что взаимодействие псевдоспинов атомов  $^{23}Na$ , связанное с их тонкой структурой, оказывается антиферромагнитным [2]. Для описания свойств бозонов спина 1, роль которых играют ультрахолодные атомы  $^{23}Na$  на оптической решетке в режиме одной частицы на узел [3, 4], приходится учитывать, в общем случае, не только спиновые, димерные и киральные корреляции, возникающие и при рассмотрении магнитных систем спина  $s = 1/2$ , но и «новые» нематические корреляции [5].

Наконец, гексагональная решетка с фрустрирующим взаимодействием следующих за ближайшими соседями активно исследуется в рамках квантовой димерной модели [6], где в основном состоянии реализуются кристаллически упорядоченные синглетные фазы [7, 8] (обзор более ранних исследований магнитных моделей на гексагональной решетке можно найти в работе [9]). Это подтверждается численными исследованиями гейзенберговской  $(J_1 - J_2 - J_3)$  модели спина  $s = 1/2$ , в которой реализуется фаза

синглетных валентных связей [10]. В этой связи упомянем, что измерение магнитных свойств  $F_2PNNNO$  прямо указывает на синглетный характер основного состояния со щелью в спектре возбуждений. Данный вывод подтверждается процессом намагничивания в сильных полях, демонстрирующим плато  $M_z = 0$  кривой намагничивания. Все это не исключает реализацию состояния типа спиновой жидкости. Сразу отметим, что применение результатов модели спинов  $S = 1$  к системе  $F_2PNNNO$  требует осторожности, поскольку, вообще говоря, структура реального соединения образована спинами  $1/2$ .

Наконец, рассмотрение гейзенберговского гамильтониана с обменной анизотропией изинговского типа для систем спина  $S = 1$  методом ренормгруппы в реальном пространстве имеет самостоятельный теоретический интерес в связи с недавним исследованием поведения слабоанизотропного гейзенберговского антиферромагнетика спина  $S = 1/2$  на квадратной решетке для конечных температур при помощи квантового метода Монте-Карло [11]. Было показано, что изинговский класс универсальности возникает уже при малых значениях анизотропии (порядка  $10^{-2} \sim 10^{-3}$  в единицах обменного интеграла), что, по мнению авторов, фактически исключает возможность разрушения дальнего порядка квантовыми флуктуациями в этом режиме. Эти результаты количественно не согласуются с расчетами методом RSRG, предсказывающим для данной модели существенно большее значение критической анизотропии (порядка 0.2).

Для решения основной задачи мы используем обобщение известного метода RSRG, предложенного впервые Марицем и др. для квантовой анизотропной гейзенберговской модели спина  $S = 1/2$  [12]. Обобщение этого метода для спинов  $S > 1/2$  оказывается нетривиальной процедурой, хотя и в этом случае мы сталкиваемся со стандартными трудностями, связанными с необходимостью разложения экспоненциальных операторов и «размножением» обменных взаимодействий из-за векторного характера спиновых операторов.

Статья организована следующим образом. В разд. 2 мы развиваем метод ренормгруппы в реальном пространстве для спина  $S = 1$  и применяем его к квантовой анизотропной гейзенберговской модели на гексагональной решетке с двумя типами обменных взаимодействий. В разд. 3 излагаются результаты расчетов методом DMRG энергии основного состояния для изотропного случая при разных значениях отношения этих обменных взаимодействий.

## 2. RSRG-АНАЛИЗ

После того как метод ренормгруппы в реальном пространстве был успешно применен для изучения двумерных изинговских систем [13, 14], большое число работ было посвящено исследованию в рамках этого подхода фазовых переходов в квантовых системах [15–17]. В последнее десятилетие RSRG-метод был использован для расчета фазовой диаграммы анизотропного гейзенберговского антиферромагнетика спина  $S = 1/2$  на квадратной решетке [18, 19]. В этих рассмотрениях используется специальная иерархическая решетка для аппроксимации исходной квадратной, и при выполнении самой ренормгрупповой процедуры (укрупнении кластера) проводится суммирование по состояниям внутренних спинов.

Недавно для исследования слабо взаимодействующих классических и квантовых спиновых цепочек был предложен ренормгрупповой метод линейных возмущений (LPRG) [20], в котором используется естественный малый параметр системы — отношение межцепочечного спаривания к внутрицепочечному. Этот пертурбативный метод использует ренормгрупповое преобразование, которое для изинговских спинов представляет собой стандартную процедуру прореживания, а для квантовых спинов — обобщение приближенной процедуры прореживания Судзуки–Такано [21]. К сожалению, метод LPRG, основанный на теории возмущений, приемлем только для случая малого отношения величины межцепочечного спаривания к внутрицепочечному обменному взаимодействию.

### А. Модель

Рассмотрим систему с анизотропным гейзенберговским взаимодействием, описываемую следующим безразмерным гамильтонианом:

$$-\beta H = \sum_{\langle i,j \rangle} K_{ij} [(1-\Delta_{ij})(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z], \quad (1)$$

где  $\beta = 1/k_B T$ ,  $K_{ij} \equiv J_{ij}/k_B T$ ,  $J_{ij}$  — величина обменного взаимодействия,  $\langle ij \rangle$  обозначает пары взаимодействующих ближайших соседей,  $\Delta_{ij}$  — параметр анизотропии и  $S_i^\alpha$   $\{\alpha = x, y, z\}$  — компоненты спина  $S = 1$  на узле  $i$ . Гамильтониан (1) соответствует изинговской ( $\Delta_{ij} = 1$ ), изотропной гейзенберговской ( $\Delta_{ij} = 0$ ) и XY-моделям ( $\Delta_{ij} = -\infty$ ).

Коротко упомянем основные элементарные операции, лежащие в основе ренормгрупповой проце-

дуры, предложенной в работе [12]. Пара параллельных связей, характеризуемых параметрами  $(K_1, \Delta_1)$  и  $(K_2, \Delta_2)$ , эквивалентна одной связи с параметрами  $(K_p, \Delta_p)$ , определяемыми соотношениями

$$K_p = K_1 + K_2,$$

$$K_p \Delta_p = K_1 \Delta_1 + K_2 \Delta_2.$$

Это правило, представляющее собой обычную процедуру Мигдала–Каданова [22, 23], тривиально обобщается на случай  $n$  параллельных связей.

Объединение двух последовательных связей с параметрами  $(K_1, \Delta_1)$  и  $(K_2, \Delta_2)$  уже не является такой простой операцией из-за проблемы некоммутативности спиновых операторов. При реализации ренормгрупповой процедуры, изменении масштаба и удалении промежуточных спинов («прореживании») гамильтониан изменяет свой вид, в котором новые обменные параметры являются некоторыми функциями от начальных обменных взаимодействий. Исходный гамильтониан имеет вид

$$H_{123} = K_1 [(1 - \Delta_1) (S_1^x S_3^x + S_1^y S_3^y) + S_1^z S_3^z] + K_2 [(1 - \Delta_2) (S_3^x S_2^x + S_3^y S_2^y) + S_3^z S_2^z].$$

Нам необходимо заменить две последовательные связи одной с гамильтонианом взаимодействия

$$H'_{12} = K_s [(1 - \Delta_s) (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + K'_0. \quad (2)$$

Это достигается требованием инвариантности вклада в статистическую сумму, вносимого взаимодействием двух крайних узлов 1 и 2, т. е.

$$\exp H'_{12} = \text{Tr}_3 \exp H_{132}, \quad (3)$$

где  $\text{Tr}_3$  обозначает операцию взятия следа по состояниям промежуточного спина 3,  $K'_0$  — некоторая дополнительная константа, включение которой необходимо для того, чтобы уравнение (3) имело решение. Уравнение (3) устанавливает связь между набором обменных параметров объединяемых связей  $(K_1, \Delta_1)$ ,  $(K_2, \Delta_2)$  и набором перенормированных параметров  $(K_s, \Delta_s, K'_0)$ . Отметим, что для анизотропной гейзенберговской модели спина  $S = 1/2$  соответствующие выражения могут быть выписаны явным образом [12, 18].

Чтобы построить рекурсионные соотношения преобразований ренормгруппы (3) для модели спина  $S = 1$ , разложим обе части равенства по определенному матричному базису и приравняем соответствующие коэффициенты этого разложения. Возникающую в этом случае проблему «размножения

констант» мы решим, оставляя только те обменные константы, что присутствуют в исходном гамильтониане (1).

Отметим, что из-за свойств матриц Паули матричное представление для  $H$  и  $\exp H$  в случае спина  $1/2$  имеет одинаковую структуру, т. е. для  $H$  и  $\exp H$  ненулевые матричные элементы находятся в одних и тех же позициях. Для спина  $S = 1$  это правило не выполняется, что приводит к существенному усложнению вычислений.

Следуя подходу работы [12], представим  $\exp H'_{12}$  в следующем виде:

$$\exp H'_{12} = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} K_{n_1 n_2} A_1^{n_1} \otimes A_2^{n_2},$$

где  $\otimes$  — внешнее произведение, а  $A_{1,2}$  — обычные степени спиновых операторов  $S_{1,2}^{x,y,z}$ . Коэффициенты  $K_{n_1 n_2}$  зависят от  $K_s, \Delta_s$  и  $K'_0$ . Поскольку  $A_{1,2}^n$  представляют собой матрицы размера  $3 \times 3$ , мы можем разложить их по базису, состоящему из поляризационных матриц  $T_q^k$  ( $k = 0, 1, 2$  и  $q = -k, -k + 1, \dots, k$ ) (см. Приложение А):

$$A_i^n = a T_0^0(i) + \sum_{M=\pm 1,0} b^M T_M^1(i) + \sum_{M=\pm 2, \pm 1, 0} c^M T_M^2(i),$$

$$i = 1, 2.$$

В свою очередь, матрицы  $T_q^k$  могут быть явным образом выражены через спиновые операторы [24]:

$$T_0^0 = \frac{1}{\sqrt{3}} I, \quad T_{\pm 1}^1 = \mp \frac{1}{2} (S^x \pm i S^y),$$

$$T_0^2 = \sqrt{\frac{3}{2}} \left( (S^z)^2 - \frac{2}{3} I \right),$$

$$T_{\pm 1}^2 = \mp \frac{1}{2} [(S^x S^z + S^z S^x) \pm i (S^y S^z + S^z S^y)],$$

$$T_{\pm 2}^2 = \frac{1}{2} [(S^x)^2 - (S^y)^2 \pm i (S^x S^y + S^y S^x)].$$

Операция  $\exp(H)$  должна сохранять симметрию гамильтониана  $H$ . Тогда, исходя из требования инвариантности, получаем наиболее общую форму разложения:

$$\begin{aligned} \exp H'_{12} = & \alpha_1 (T_0^0(1) \otimes T_0^0(2)) + \alpha_2 (T_0^1(1) \otimes T_0^1(2)) + \\ & + \alpha_3 (T_0^2(1) \otimes T_0^2(2)) + \beta (T_1^1(1) \otimes T_{-1}^1(2) + \\ & + T_{-1}^1(1) \otimes T_1^1(2)) + \\ & + \gamma (T_2^2(1) \otimes T_{-2}^2(2) + T_{-2}^2(1) \otimes T_2^2(2)) + \\ & + \sigma (T_1^2(1) \otimes T_{-1}^2(2) + T_{-1}^2(1) \otimes T_1^2(2)) \quad (4) \end{aligned}$$

с новым набором констант взаимодействия  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta, \gamma, \sigma$  (индексы в скобках указывают номер узла). Применяя это разложение, получим

$$\exp H'_{12} = \begin{pmatrix} A_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B_{12} & 0 & C_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D_{12} & 0 & F_{12} & 0 & G_{12} & 0 & 0 \\ 0 & C_{12} & 0 & B_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & F_{12} & 0 & E_{12} & 0 & F_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & B_{12} & 0 & C_{12} & 0 \\ 0 & 0 & G_{12} & 0 & F_{12} & 0 & D_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{12} & 0 & B_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{12} \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где введены матричные элементы  $A_{12} \equiv \alpha_1/3 + \alpha_2/2 + \alpha_3/6, B_{12} \equiv \alpha_1/3 - \alpha_3/3, C_{12} \equiv -\beta/2 - \sigma/2, D_{12} \equiv \alpha_1/3 - \alpha_2/2 + \alpha_3/6, E_{12} \equiv \alpha_1/3 + 2\alpha_3/3, F_{12} \equiv -\beta/2 + \sigma/2, G_{12} \equiv \gamma$ .

Действуя аналогично, можно получить замкнутое выражение для разложения  $\text{Tr}_3 \exp H_{123}$ , схожее по структуре с  $\exp H'_{12}$ , в котором коэффициенты в разложении (4) являются функциями параметров,

входящих в  $H_{123}$ .

Для расчета экспонент от матриц необходимо численно диагонализировать матрицы размера  $9 \times 9$  и  $27 \times 27$ , связанные соответственно с  $H'_{12}$  и  $H_{123}$ . Пользуясь соотношениями

$$\exp H'_{12} = U_{12} \exp(H_{12}^D) U_{12}^\dagger,$$

$$\exp H_{123} = U_{123} \exp(H_{123}^D) U_{123}^\dagger,$$

в которых  $U_{12}, U_{123}$  — унитарные матрицы, приводящие  $H'_{12}, H_{123}$  к диагональной форме  $H_{12}^D, H_{123}^D$ , мы можем численно найти  $\exp H'_{12}$  и  $\exp H_{123}$  как функции соответствующих наборов обменных параметров. Одинаковая матричная структура (5) для  $\exp H'_{12}$  и  $\text{Tr}_3 \exp H_{123}$  подтверждается прямым численным расчетом. В результате вычислений получаем набор параметров  $\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta, \gamma, \sigma\}$  для  $\exp H_{12}$  и  $\{\bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2, \bar{\alpha}_3, \bar{\beta}, \bar{\gamma}, \bar{\sigma}\}$  для  $\text{Tr}_3 \exp H_{123}$ . Требуемые ренормгрупповые уравнения получаются при наложении условий

$$\alpha_1 = A_{12} + B_{12} + D_{12} = \bar{A}_{12} + \bar{B}_{12} + \bar{D}_{12} = \bar{\alpha}_1, \quad (6)$$

$$\alpha_2 = A_{12} - D_{12} = \bar{A}_{12} - \bar{D}_{12} = \bar{\alpha}_2, \quad (7)$$

$$\beta = -C_{12} - F_{12} = -\bar{C}_{12} - \bar{F}_{12} = \bar{\beta} \quad (8)$$

и

$$\alpha_3 = E_{12} - B_{12} = \bar{E}_{12} - \bar{B}_{12} = \bar{\alpha}_3,$$

$$\gamma = G_{12} = \bar{G}_{12} = \bar{\gamma}, \quad (9)$$

$$\sigma = F_{12} - C_{12} = \bar{F}_{12} - \bar{C}_{12} = \bar{\sigma}.$$

Очевидно, число этих уравнений превышает число взаимодействий, входящих в исходный гамильтониан (2), поскольку генерируются всевозможные билинейные взаимодействия между конечными спинами. Для выполнения процедуры прореживания мы оставим три уравнения (6), (7), (8), отвечающие гейзенберговским взаимодействиям в исходном гамильтониане (1), которые неявным образом определяют  $K_s, \Delta_s$  и  $K'_0$  как функции  $(K_1, \Delta_1), (K_2, \Delta_2)$ . Эта система уравнений — прямой аналог ренормгрупповых соотношений для случая спина  $S = 1/2$  (см. уравнения (12) в работе [12]).

Следующий важный шаг ренормгрупповой процедуры — выбор иерархической решетки. Мы возьмем простейший вариант ячейки с 6 узлами и 6 связями, изображенной на рис. 2, сохраняющей точечную симметрию исходной решетки. Затем мы накладываем условие сохранения вклада в статистическую сумму от взаимодействия крайних спинов 3 и 6 в исходном и перенормированном графах. На первом шаге мы применяем «прореживание»  $R_S$ , когда сохраняются спины 1 и 3 (или 4 и 6), тогда как спины 2 и 5 удаляются. На втором шаге процедура «прореживания» повторяется, что приводит к удалению спинов 1 и 4. Наконец, чтобы окончательно получить перенормированные параметры, мы применяем «сдвиг связей» Мигдала–Каданова, объеди-

няя оставшиеся параллельные связи. В результате получаем рекурсионные соотношения

$$\begin{aligned} (K_S, \Delta_S) &= R_S(K_2, \Delta_2; K_1, \Delta_1), \\ (K'_S, \Delta'_S) &= R_S(K_S, \Delta_S; K_1, \Delta_1), \\ (K_p, \Delta_p) &= 2(K'_S, \Delta'_S). \end{aligned} \quad (10)$$

Критические точки системы определяются как нетривиальные неподвижные точки этих уравнений, которые удобно переписать в виде сложной функции

$$(K_p, \Delta_p) = 2R_S(R_S(K_1, \Delta_1; K_2, \Delta_2); K_1, \Delta_1). \quad (11)$$

К сожалению, в отличие от случая спина  $S = 1/2$ , получить явные ренормгрупповые уравнения невозможно, поэтому мы кратко опишем использованную численную процедуру. В качестве исходных параметров рассматриваются отношение межцепочечного спаривания к внутрицепочечному  $C_1 = J'_{AF}/J_{AF}$ , а также параметр анизотропии  $\Delta = \Delta_1$ , и кроме того, предполагаем, что  $\Delta_2 = C_1 \Delta$ , т. е. вид анизотропии одинаков как для внутрицепочечного, так и для межцепочечного взаимодействия. Задавая произвольное стартовое значение внутрицепочечного спаривания  $K_1^{(i)}$  (при этом константа внутрицепочечного взаимодействия  $K_2^{(i)} = C_1 K_1^{(i)}$ ), мы применяем два последовательных шага «прореживания» и получаем перенормированную константу спаривания  $K'_S$ . В ходе выполнения каждого шага решается система уравнений (6), (7), (8). (Для этой цели годится стандартная процедура решения нелинейных систем уравнений [25].) Затем мы удваиваем результат, полученный в результате этих преобразований, и находим конечное значение  $K^{(f)}$  как функцию стартового значения  $K_1^{(i)}$ . На завершающем этапе мы определяем неподвижную точку  $K_c$  уравнения  $K_1^{(i)} = K^{(f)}(K_1^{(i)})$  используя, например, метод половинного деления.

## В. Результаты

Обратная критическая температура  $K_c = 1/T_c$  как функция параметра  $C_1$  представлена на рис. 3 для нескольких значений параметра анизотропии  $\Delta$ . Как видно на рис. 3, критическая температура быстро уменьшается с ослаблением межцепочечного взаимодействия. Зависимости критической температуры от величины параметра обменной анизотропии  $\Delta$  показаны на рис. 4, все они соответствуют изинговскому классу универсальности. В отличие от ряда ренормгрупповых исследований в реальном пространстве для спина  $S = 1/2$  фазовая диаграмма

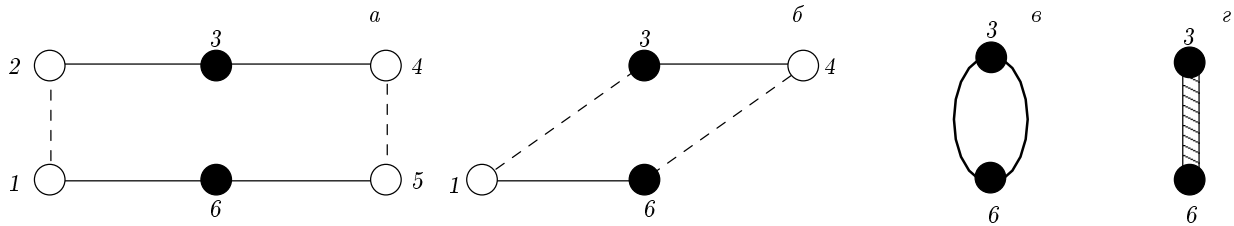


Рис. 2. Граф, используемый в ренормгрупповой процедуре

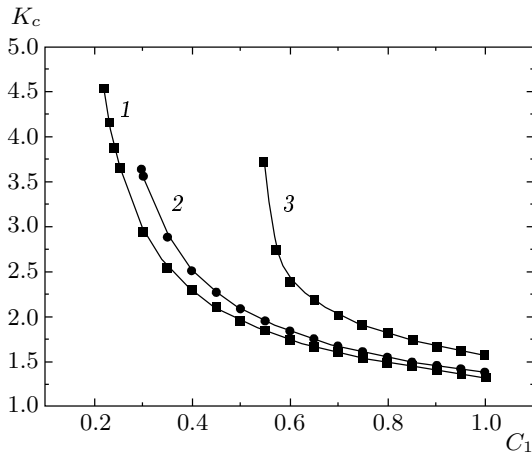


Рис. 3. Обратная критическая температура ( $K_c$ ) в зависимости от отношения  $C_1 = J'_{AF}/J_{AF}$ , рассчитанная из ренормгрупповых рекурсионных соотношений для разных значений анизотропии:  $\Delta = 1.0$  (1), 0.8 (2), 0.6 (3)

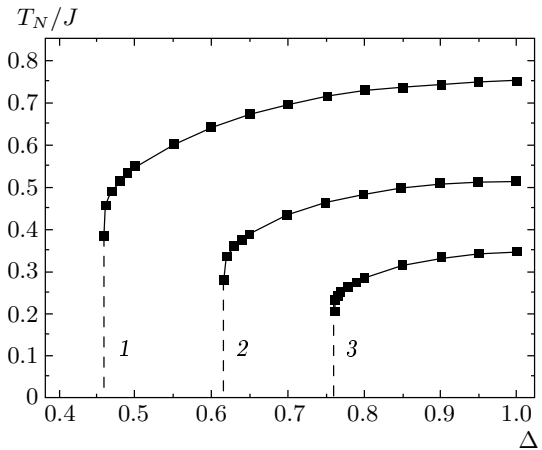


Рис. 4.  $(T_N, \Delta)$ -фазовая диаграмма для различных значений отношения  $C_1 = J'_{AF}/J_{AF}$ : 1.0 (1), 0.5 (2), 0.3 (3). Область выше (ниже) критической линии соответствует разупорядоченной (упорядоченной) фазе. Пунктирные линии проведены на глаз

для ферромагнитной и антиферромагнитной моделей одинакова: критическая температура достигает нуля при некотором ненулевом критическом значении  $\Delta_c$ . Уменьшение межцепочечного спаривания усиливает квантовые флуктуации, что сказывается на увеличении значений  $\Delta_c$  при уменьшении  $C_1$ .

Следует отметить, что мы не обнаружили в исследованном интервале температур возвратного поведения критической линии  $(T, \Delta)$ , обнаруженного в некоторых RSRG-исследованиях моделей спина  $s = 1/2$  [18, 19]. Эти результаты предполагают, что имеется упорядоченная фаза при относительно высоких температурах, которая исчезает при охлаждении. Отметим в этой связи работу [26], где авторы рассматривают этот результат как артефакт метода и связывают возвратное поведение с конечным размером кластера, используемого при ренормгрупповой процедуре. С увеличением его размера эффект должен исчезать.

Вблизи критического значения анизотропии  $\Delta = \Delta_c$  температура Нееля ведет себя по закону

$$T_N \propto \frac{1}{\ln(\Delta - \Delta_c)} \quad (12)$$

(см. рис. 5), что качественно согласуется с результатом, полученным для случая спина  $S = 1/2$ . К сожалению, результаты численного расчета не могут быть экстраполированы на случай  $T = 0$ , и мы не можем поэтому сделать каких-либо определенных заключений о характере основного состояния модели. Скейлинговое соотношение (12) сохраняется для разных значений отношения межцепочечного и внутрицепочечных спариваний. Логарифмическая зависимость  $T_N$  и  $T_c$  от разности  $\Delta - \Delta_c$  была получена ранее для анизотропного антиферромагнетика спина  $s = 1/2$  в работах [27, 28] с помощью теории скейлинга и квантового метода Монте-Карло, однако с критическим значением  $\Delta_c = 0$ .

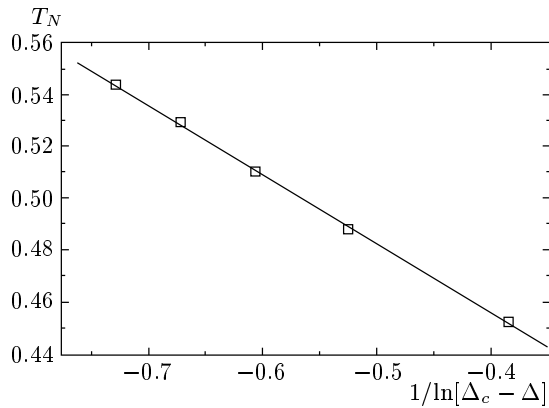


Рис. 5.  $(T_N, \Delta)$ -фазовая диаграмма для малых значений  $T_N$  вблизи  $\Delta_c$ . Параметр  $\Delta_c \approx 0.46$  для  $C_1 = 1.0$

Наконец, обсудим эквивалентность (изоморфизм) критических свойств для ферромагнитной и антиферромагнитной моделей. Хорошо известно, что в классических спиновых моделях, таких как изинговская или классическая гейзенберговская модели с двумя подрешетками, критическая температура (если она существует) одинакова для ферромагнитного (температура Кюри) и для антиферромагнитного (температура Нееля) обменного взаимодействия между ближайшими соседями. Это прямое следствие того, что свободная энергия является четной функцией обменного параметра. Однако исследования квантовой гейзенберговской модели спина  $1/2$  для простой кубической и объемноцентрированных решеток показали, что температура Нееля примерно на 10% выше температуры Кюри, хотя эта разница быстро уменьшается с ростом  $S$  [29]. Недавно этот вопрос вновь был исследован для трехмерного случая и спинов  $S = 1/2, 1, 3/2$  при помощи метода высокотемпературных разложений [30]. Для некоторых квантовых систем, таких как поперечная модель Изинга, XY-модель с квантовым спином  $1/2$ , имеется изоморфизм критических свойств для ферромагнитного и антиферромагнитного случаев [31]. Отметим, что исследование критических свойств гейзенберговской модели спина  $1/2$  с анизотропным взаимодействием на квадратной решетке приближенными методами, например методом функций Грина, приводит к результату  $T_c = T_N$  при всех значениях параметра анизотропии [32, 33]. В работах [18, 19] методами ренормгруппы в реальном пространстве было получено соотношение  $T_N < T_c$  для  $0 \leq \Delta < 1$ . При этом использовался специальный

выбор иерархической решетки, аппроксимирующей квадратную. Для ферромагнитного взаимодействия температура Кюри  $T_c$  непрерывно убывает до нуля с уменьшением параметра анизотропии  $\Delta$ , что дает  $T_c = 0$  в изотропном пределе ( $\Delta = 0$ ) в полном согласии с теоремой Мермина–Вагнера [34]. Результаты же для антиферромагнитного случая аналогичны результатам, представленным в данной работе — неелевское упорядочение отсутствует ниже некоторого критического значения  $\Delta < \Delta_c$ . Очевидно, что необходимы дальнейшие исследования этой проблемы.

Один из главных качественных результатов RSRG-анализа — отсутствие дальнего порядка в изотропном пределе  $\Delta = 0$ . В следующем разделе мы проводим DMRG-расчет энергии основного состояния модели и показываем, что эта величина оказывается существенно ниже значения, предсказываемого картиной классического неелевского упорядочения, что указывает на существование сильноразвитых квантовых флуктуаций в системе.

### 3. DMRG-АНАЛИЗ

Алгоритм DMRG (Density Matrix Renormalization Group) является одним из наиболее мощных методов исследования свойств низкоразмерных систем. Этот подход позволяет получить весьма точный результат для волновой функции искомого целевого состояния (основного или одного из низколежащих возбужденных состояний) и наблюдаемых величин (энергии, корреляционных функций и т. д.), используя базис сравнительно небольшой размерности  $m$  (обычно  $m \sim 50\text{--}150$ ). Ключевой момент DMRG-алгоритма состоит в выборе этих  $m$  базисных функций, так чтобы разность между истинной волновой функцией  $\psi$  и ее DMRG-приближением  $\tilde{\psi}$  была минимальной.

Оригинальный одномерный алгоритм DMRG был предложен Уайтом [35, 36] в начале 90-х годов прошлого века. Метод дает очень точные значения для энергии основного состояния гейзенберговских цепочек спина  $S = 1/2, 1$ , а также ряда других моделей [37]. Однако расширение алгоритма DMRG для двумерных систем оказалось нетривиальной задачей и в настоящее время не имеет единой формулировки.

Впервые метод DMRG был применен к двумерной фрустрированной квантовой спиновой модели для соединения  $\text{CaV}_4\text{O}_9$  [38]. Позднее метод применялся для исследования двумерной  $t$ - $J$ -модели

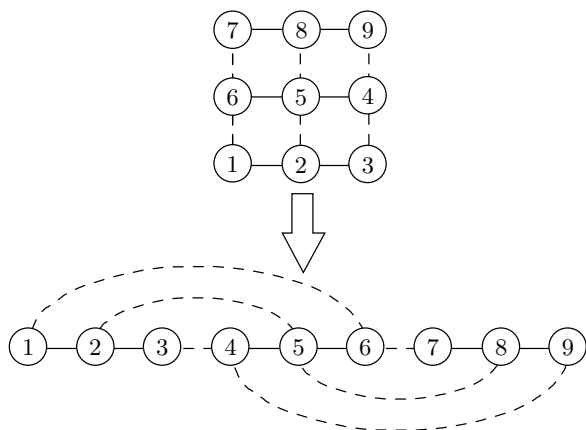


Рис. 6. Пример отображения двумерной решетки на одномерную спиновую цепочку

ли [39–41] и квантовых холловских систем [42, 43]. Различным применениям алгоритма DMRG к двумерным системам посвящен обзор [44].

Основное различие между вариантами, предлагаемыми различными авторами, заключается в способе «наращивания» системы. Так, одно из простых расширений на двумерный случай выглядит следующим образом. Если в одномерном алгоритме DMRG к системе, как правило, добавляются отдельные узлы, то в двумерном варианте мы можем присоединять к решетке целые колонки спинов [45], когда в процессе вычислений размер решетки вдоль  $y$ -оси остается постоянным, а ее размер вдоль направления  $x$  возрастает. Несмотря на то, что такой подход достаточно легко реализовать практически, он имеет существенный недостаток — нежелательный рост вычислений, поскольку для описания взаимодействия двух «колонок» спинов высоты  $M$  в гамильтониан придется включать  $M$  дополнительных связей на каждом шаге алгоритма. В других подходах систему наращивают блоками еще более сложной формы [46–48], что позволяет сохранить топологические характеристики двумерных решеток, но по-прежнему требует учета большого числа новых связей и предъявляет высокие требования к вычислительным ресурсам.

Собственно с точки зрения вычислений наиболее простыми являются методы «линейного роста», в которых на каждом шаге «наращивания» системы добавляется по одному узлу. К числу таких вариантов DMRG принадлежит алгоритм, предложенный в работе [49] для исследования двумерной модели Хаббарда. В основе алгоритма лежит отображение двумерной спиновой решетки на одномерную спиновую

$J_2/J_1$	$E_0$	$E_0/N$	$E_N$
2.0	-35.1	-1.67	-27.0
1.0	-27.21	-1.296	-21.0
0.5	-23.95	-1.141	-18.0
0.333	-23.08	-1.099	-17.0
0.1	-22.218	-1.0580	-15.6
0.01	-22.1119	-1.0529	-15.06

цепочку (см. рис. 6). Если изначально в двумерной системе учитываются взаимодействия ближайших соседей, то при соответствующем отображении в одномерной цепочке появляются взаимодействия между узлами, находящимися достаточно далеко друг от друга. Для построенной таким образом одномерной цепочки может быть применен традиционный одномерный алгоритм DMRG (нами использовался вариант для конечных решеток). При помощи этого метода мы исследовали свойства основного состояния изотропного гейзенберговского антиферромагнетика спина  $S = 1$  на гексагональной решетке с двумя типами обменных взаимодействий  $J_1 = J_{AF}$  и  $J_2 = J'_{AF}$ .

Для расчета энергии основного состояния  $E_0$  был взят кластер размера  $6 \times 3$ . Параметр  $J_2/J_1$  варьировался в пределах от 2 до 0.01. Во всех случаях размерность базиса равнялась  $m = 50$ . Полученные результаты для  $E_0$  (в единицах обменного интеграла  $J_1$ ) представлены в таблице. В ней же мы приводим значения энергии на связь  $E_0/N$ . Для решетки размера  $6 \times 3$  число связей  $N = 21$  (15 горизонтальных и 6 вертикальных). Согласно предыдущим исследованиям [35], энергия основного состояния невзаимодействующих изотропных гейзенберговских цепочек  $S = 1$  должна быть равной  $-1.401 \cdot 15 = -21.0125$ , т. е. складываться из энергий трех независимых цепочек с пятью связями в каждой. Как видно в таблице, значение  $E_0$  стремится к этой величине, когда  $J_2/J_1 \rightarrow 0$ , что свидетельствует о приемлемости полученных результатов.

Энергия основного состояния достигает своего предельного значения достаточно быстро, приблизительно за 50 шагов. Отметим, что зависимость энергии основного состояния  $E_0$  от  $n$ -го номера шага DMRG-алгоритма имеет ступенчатый характер. Об аналогичном поведении энергии основного состояния с ростом числа итераций уже сообщалось в недавней работе [46], где исследовался антиферромагнетик спина  $S = 1/2$  на квадратной решетке.

В последнем столбце таблицы приведены значе-



ния энергии основного состояния  $E_N$  для классического неелевского упорядочения. (Для взятого нами кластера  $E_N = J_1[-15 - 6J_1/J_2]$ .) Существенная разница между этими величинами и значениями DMRG-расчета свидетельствует о сильно развитых квантовых флуктуациях в основном состоянии системы.

В заключение отметим, что результаты ренормгруппового анализа, предсказывающего существование критической анизотропии, качественно согласуются с исследованиями свойств основного состояния двумерных квантовых спиновых систем, в которых может реализоваться основное состояние упорядоченных валентных связей (VBS). С помощью модели вершинных состояний [50] и вариационного метода тензорных произведений (один из вариантов ренормгруппы матрицы плотности) [51] исследовались модели спина  $3/2$  на гексагональной решетке, а также спина  $2$  на квадратной решетке. Эти VBS-модели содержат так называемый параметр «деформации» (контролируемый вариационный параметр, меняющий вес максимально поляризованных состояний, в основном и представленных в неелевской фазе), что соответствует  $xxz$ -типу анизотропии гамильтониана. Было показано, что в изотропном случае VBS-модели описывают разупорядоченную фазу, отличающуюся от неелевской. Главный результат этих исследований — существование фазового перехода второго рода из разупорядоченной фазы с экспоненциальным затуханием спин-спиновых корреляционных функций в фазу с неелевским порядком и длинномасштабными корреляциями при увеличении параметра «деформации» (анизотропии). Фазовый переход принадлежит классу универсальности двумерной изинговской модели.

Анализ двумерных квантовых систем спина  $1$  вариационными ренормгрупповыми методами сталкивается с объективными трудностями. Например, метод матричных произведений [52, 53] позволяет успешно учитывать VBS-состояния в одномерных цепочках спина  $1$ , однако обобщить этот подход на двумерные системы в виде метода тензорных произведений не удастся, поскольку система не имеет основного состояния упорядоченных валентных связей (величина спина  $S$  не согласуется с числом ближайших соседей  $z$ , т. е.  $2S \neq z$ ). Проблема до сих пор остается открытой, в этой связи представленные нами результаты позволяют предположить, что критическая анизотропия и связанный с ней фазовый переход существуют и для двумерных квантовых систем спина  $S = 1$ .

Мы выражаем признательность М. В. Садовскому и Н. В. Баранову за обсуждение результатов работы. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта REC-005 Американского фонда гражданских исследований и развития (CRDF).

## ПРИЛОЖЕНИЕ А

Поляризационные матрицы спина  $S = 1$  имеют следующий вид:

$$T_0^0 = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad T_1^1 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$T_{-1}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_0^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$T_0^2 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad T_1^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$T_{-1}^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_2^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$T_{-2}^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

## ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Hosokoshi, Y. Nakazawa, K. Inoue, K. Takizawa, H. Nakano, M. Takahashi, and T. Goto, Phys. Rev. B **60**, 12924 (1999).
2. J. Stenger, S. Inoue, D. M. Stamper-Kurn, H.-J. Miesner, A. P. Chikkatur, and W. Ketterle, Nature **396**, 345 (1999).
3. T. L. Ho and S. K. Yip, Phys. Rev. Lett. **84**, 4031 (2000).
4. S. Yip, J. Phys.: Condens. Matter **15**, 4583 (2003).
5. S. Yip, Phys. Rev. Lett. **90**, 250402 (2003).
6. D. S. Rokhsar and S. A. Kivelson, Phys. Rev. Lett. **61**, 2376 (1998).
7. R. Moessner, S. L. Sondhi, and P. Chandra, Phys. Rev. B **64**, 144416 (2001).

8. E. Fradkin, D. A. Huse, R. Moessner, V. Oganesyan, and S. L. Sondhi, *Phys. Rev. B* **69**, 224415 (2004).
9. A. Mattsson, P. Frojdh, and T. Einarsson, *Phys. Rev. B* **49**, 3997 (1994).
10. J. B. Fouet, P. Sindzingre, and C. Lhuillier, *Eur. Phys. J. B* **20**, 241 (2001).
11. A. Cuccoli, T. Roscilde, V. Tognetti, R. Vaia, and P. Verrucchi, *Phys. Rev. B* **67**, 104414 (2003).
12. A. M. Mariz, C. Tsallis, and A. O. Caride, *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* **18**, 4189 (1985).
13. Th. Niemeijer and J. M. J. van Leeuwen, *Phys. Rev. Lett.* **31**, 1412 (1973).
14. L. P. Kadanoff and A. Houghton, *Phys. Rev. B* **11**, 377 (1975).
15. J. Rogiers and R. Dekeyser, *Phys. Rev. B* **13**, 4886 (1976).
16. A. L. Stella and F. Toigo, *Phys. Rev. B* **17**, 2343 (1978).
17. R. C. Brower, F. Kuttner, M. Nauenberg, and K. Subbarao, *Phys. Rev. Lett.* **38**, 1231 (1977).
18. A. M. C. de Souza, *Phys. Rev. B* **48**, 3744 (1993).
19. N. S. Branco and J. R. de Sousa, *Phys. Rev. B* **62**, 5742 (2000).
20. J. Sznajd, *Phys. Rev. B* **63**, 184404 (2001).
21. M. Suzuki and H. Takano, *Phys. Lett. A* **69**, 426 (1979); H. Takano and M. Suzuki, *J. Stat. Phys.* **26**, 635 (1981).
22. А. А. Мигдал, *ЖЭТФ* **69**, 810, 1457 (1975).
23. L. P. Kadanoff, *Ann. Phys.* **100**, 359 (1976).
24. D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, and V. K. Khersonskii, *Quantum Theory of Angular Momentum*, World Scientific (1988).
25. W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press (1992).
26. J. R. de Souza and I. G. Araujo, *Phys. Lett. A* **272**, 333 (2000).
27. H.-Q. Ding, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 7979 (1990).
28. S. S. Aplesnin, *Phys. Sol. St.* **207**, 491 (1998).
29. G. S. Rushbrooke and P. J. Wood, *Mol. Phys.* **6**, 409 (1963).
30. J. Oitmaa and W. Zheng, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, 8653 (2004).
31. J. R. de Souza and I. G. Araujo, *J. Magn. Magn. Mat.* **202**, 231 (1999).
32. R. P. Singh, Z. C. Tao, and M. Singh, *Phys. Rev. B* **46**, 1244 (1992).
33. B. G. Liu, *Phys. Rev. B* **41**, 9563 (1990).
34. N. D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
35. S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).
36. S. R. White, *Phys. Rev. B* **48**, 10345 (1993).
37. I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke, and K. Hallberg (eds.), *Density-Matrix Renormalization*, Springer, Heidelberg (1998).
38. S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3633 (1996).
39. S. R. White and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1272 (1998).
40. S. R. White and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **60**, R753 (1999).
41. S. R. White and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **61**, 6320 (2000).
42. N. Shibata and D. Yoshioka, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5755 (2001).
43. D. Yoshioka and N. Shibata, *Physica E* **12**, 43 (2002).
44. N. Shibata, *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, R381 (2003).
45. M. S. L. du Croo de Jongh, J. M. J. van Leeuwen, and W. van Saarloos, *Phys. Rev. B* **62**, 14844 (2000).
46. D. J. J. Farnell, *Phys. Rev. B* **68**, 9561 (2003).
47. P. Henelius, *Phys. Rev. B* **60**, 9561 (1999).
48. T. Xiang, J. Lou, and Z. Su, *Phys. Rev. B* **64**, 104414 (2001).
49. S. Liang and H. Pang, *Phys. Rev. B* **49**, 9214 (1994).
50. H. Niggemann, A. Klümper, and J. Zittartz, *Z. Phys. B* **104**, 103 (1997).
51. Y. Hieida, K. Okunishi and Y. Akutsu, *New J. Phys.* **1**, 7 (1999).
52. A. Klümper, A. Schadschneider, and J. Zittartz, *Z. Phys. B* **87**, 281 (1992).
53. A. Klümper, A. Schadschneider, and J. Zittartz, *J. Phys. A* **24**, L955 (1991).